сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-81-455

К.И.Иванов, А.Т.Маринов

ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ АСИМПТОТИЧЕСКИХ РЯДОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ДВУХЦЕНТРОВЫХ КУЛОНОВСКИХ ФАЗ РАССЕЯНИЯ И ЗНАЧЕНИЙ РАДИАЛЬНЫХ КУЛОНОВСКИХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ с-ТИПА

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени создано несколько алгоритмов вычисления двухцентровых кулоновских фаз рассеяния непрерывного спектра[1-4], при которых обязательно интегрируются дифференциальные уравнения. При алгоритме Пономарева и Сомова[1] значения регулярных и нерегулярных радиальных кулоновских сфероидальных функций c-типа /РКСФс/ вычисляются с использованием начальных условий, задаваемых вначале с помощью соответствующих асимптотических выражений. В работе[3] интегрирование дифференциального уравнения для регулярной РКСФс проводится до некоторой точки, в которой определяется и значение подходящей линейной комбинации нерегулярных РКСФс обратным интегрированием этого уравнения из отдаленной точки. Значения этой линейной комбинации и ее производной в отдаленной точке вычисляются с помощью асимптотических разложений. В работе[4] предлагается метод фазовых функций для вычисления кулоновских фаз рассеяния и нормировочных множителей волновых функций двухцентровой задачи с использованием подходящего эффективного потенциала.

В настоящей работе для вычисления значений нерегулярных РКСФс используются подходящие частичные суммы асимптотических рядов, описывающих их поведение на бесконечности, к которым добавляются коррекционные члены, чтобы получаемая ошибка становилась минимальной.

Как известно, асимптотический ряд данной функции дает полусходящиеся приближения этой функции. Это означает, что модуль разницы между значениями функции и n-й частичной суммой ее асимптотического ряда в данной точке становится минимальным для некоторого номера n_0. Мы показали, что к n-м частичным суммам асимптотических рядов нерегулярных РКСФс можно добавлять коррекционные члены, являющиеся членами абсолютно и равномерно сходящихся итерационных рядов, и, таким образом, сделать абсолютную погрешность меньше произвольного положительного числа /см. теорему в разделе 2/. Во многих случаях погрешность можно сделать достаточно малой путем добавления минимального числа коррекционных членов в точке, принадлежащей кругу сходимости степенного ряда для регулярной РКСФс. В этих случаях фаза рассеяния и нормировочный множитель волновой функции вычисляются непосредственно. В остальных случаях, чтобы не брать большого числа коррекционных членов, достаточно провести интегрирование дифференциального уравнения для регулярной РКСФс до точки, в которой с достаточной точностью можно определить значения нерегулярных функций.

В разделе 3 получены оценки относительных погрешностей, получаемых при использовании n_0 частичных сумм и при добавлении к ним первого коррекционного члена. Как видно из этих оценок, метод является особенно эффективным при больших энергиях, но его можно успешно использовать и при произвольных значениях энергии. При очень малых энергиях обычно проводится интегрирование дифференциального уравнения для регулярной РКСФс.

Отметим, что в этой работе используется система единиц, в которой $\hbar=1$, скорость света в пустоте $c=1$, заряд позитрона равен единице, а масса рассеивающейся частицы равна 1/2.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФАЗ РАССЕЯНИЯ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА ДВУХЦЕНТРОВОЙ КУЛОНОВСКОЙ ЗАДАЧИ

В выбранной системе единиц потенциальная энергия частицы с массой 1/2 и с зарядом Z в поле двух кулоновских центров имеет вид

$$U(\vec{r}) = \frac{\alpha\xi+\beta\eta}{f^2(\xi^2-\eta^2)}, \qquad /1/$$

$$\alpha = \frac{fZ(Z_1+Z_2)\cdot 10^{-2}}{1{,}3703602}, \quad \beta = \frac{fZ(Z_2-Z_1)\cdot 10^{-2}}{1{,}3703602}, \qquad /2/$$

где Z_1 и Z_2 - заряды кулоновских центров; f - половина расстояния между ними, а ξ и η - вытянутые сфероидальные координаты точки /5/. После разделения переменных в уравнении Шредингера получаем радиальное уравнение:

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{d\Pi_m}{d\xi}\right] + \left[-\lambda+c^2(\xi^2-1)-\alpha\xi-\frac{m^2}{\xi^2-1}\right]\Pi_m = 0, \qquad /3/$$

$$c = fk \qquad (\xi\geq 1,\ m=0,1,\ldots), \qquad /4/$$

в котором k^2 - энергия частицы. Уравнение /3/ решается при значениях λ, равных собственным значениям $\lambda_{m\ell}(c)$ $(\ell=0,1,\ldots,m=0,1,\ldots\ell)$ задачи Штурма-Лиувилля, которая определяет кулоновские сфероидальные функции c-типа: $\Xi_{mq}(c,-\beta;\eta)$, $(q=\ell-m)$ /5/.

Для регулярного решения уравнения /3/ используем разложение

$$\Pi_m(\xi) \equiv \Pi_m(\alpha,\lambda,c;\xi) = (\xi^2-1)^{m/2}\sum_{\nu=0}^{\infty} g^m_\nu(\alpha,\lambda,c)(\xi-1)^\nu, \qquad /5/$$

которое приводит к четырехчленным рекуррентным соотношениям для коэффициентов g_ν^m:

$$g_\nu^m = \alpha_\nu^m g_{\nu-1}^m + \beta_\nu^m g_{\nu-2}^m + \gamma_\nu^m g_{\nu-3}^m , \qquad /6/$$

$$\alpha_\nu^m = \frac{\lambda + a - (\nu-1)(\nu-2) - (m+1)(m+2\nu-2)}{2\nu(\nu+m)}, \quad \beta_\nu^m = \frac{a - 2c^2}{2\nu(\nu+m)}, \qquad /7/$$

$$\gamma_\nu^m = \frac{-c^2}{2\nu(\nu+m)} \quad (\nu = 1,2,\ldots, g_0^m = 1,\ g_{-1}^m = g_{-2}^m = 0).$$

Если $\alpha \neq \pm\beta$, то радиус сходимости степенного ряда /5/ равен двум. В тех случаях, когда $\alpha = \pm\beta$, ряд /5/ определяет целую функцию ξ. Отметим, что для регулярного решения можно использовать разложение, приводящее к трехчленным рекуррентным соотношениям с комплексными коэффициентами, однако такое разложение оказывается малоэффективным для численных расчетов.

Дифференциальное уравнение /3/ имеет два нерегулярных решения, которые можно представить следующими асимптотическими рядами:

$$\Pi_m^{\pm}(\xi) = \Pi_m^{\pm}(a,\lambda,c;\xi) = \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{m/2} e^{\pm i[c\xi - \frac{a}{2c}\ln(\xi+1)]} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{C_\nu^{m,\pm}}{(\xi+1)^\nu}. \qquad /8/$$

Эти асимптотические разложения приводят к трехчленным рекуррентным соотношениям для коэффициентов $C_\nu^{m,\pm}$:

$$C_\nu^{m,\pm} = A_\nu^{m,\pm} C_{\nu-1}^{m,\pm} + B_\nu^{m,\pm} C_{\nu-2}^{m,\pm} , \qquad /9/$$

$$A_\nu^{m,\pm} = \frac{(a+4c)(\nu - \frac{3}{2}) + 2cm \pm i[\lambda + a + \frac{a^2}{4c^2} - (\nu-1)(\nu-2)]}{2c(\nu-1)},$$

$$B_\nu^{m,\pm} = \frac{-a[\frac{2}{c}(\nu-2) + \frac{m}{c}] \mp i[\frac{a^2}{2c^2} - 2(\nu-2)(\nu-2+m)]}{2c(\nu-1)} \qquad /10/$$

$$(\nu = 2,3,\ldots, C_1^{m,\pm} = 1, C_0^{m,\pm} = 0).$$

Подходящие частичные суммы рядов /8/ можно использовать для вычисления значений функций $\Pi_m^{\pm}$ и их производных в данной точке ξ. Для получаемой при этом ошибки

$$\frac{\partial^\kappa O_m^{n,\pm}(\xi)}{\partial\xi^\kappa} \overset{\Delta}{=} \frac{\partial^\kappa}{\partial\xi^\kappa}\Pi_m^{\pm}(\xi) - \frac{\partial^\kappa}{\partial\xi^\kappa}\sigma_m^{n,\pm}(\xi) \qquad (\kappa=0,1), \tag{11}$$

$$\sigma_m^{n,\pm}(\xi) = \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{m/2} e^{\pm[c\xi - \frac{a}{2c}\ln(\xi+1)]} \sum_{\nu=1}^{n} \frac{C_\nu^{m,\pm}}{(\xi+1)^\nu} \tag{12}$$

$(n=1,2,\ldots,\ c>0)$,

используя дифференциальное уравнение /3/ и рекуррентные соотношения /8/, находим интегральное представление:

$$\frac{\partial^\kappa O_m^{n,\pm}(\xi)}{\partial\xi^\kappa} = \frac{1}{c}\int_\xi^\infty \left(\frac{t-1}{t+1}\right)^{m/2} \frac{\partial^\kappa}{\partial\xi^\kappa}\left[\frac{g_m(c;\xi,t)}{\sqrt{\xi^2-1}}\right] \frac{\Gamma_m^{n,\pm}(t)\,dt}{\sqrt{t^2-1}\,(t+1)^n}, \tag{13}$$

где

$$g_m(c;\xi,t) = \frac{1}{2i}\sqrt{(\xi^2-1)(t^2-1)}\,\{\Pi_m^-(\xi)\,\Pi_m^+(t) - \Pi_m^-(t)\,\Pi_m^+(\xi)\}, \quad (1<\xi\le t), \tag{14}$$

$$\Gamma_m^{n,\pm}(t) = e^{\pm i[ct - \frac{a}{2c}\ln(t+1)]}\left\{S_m^{n,\pm}(a,\lambda,c) + \frac{T_m^{n,\pm}(a,\lambda,c)}{t+1}\right\}, \tag{15}$$

$$S_m^{n,\pm} = C_n^{m,\pm}\left\{\frac{a^2}{4c^2} + a + \lambda - n(n-1) \mp i\left[2c(m-1+2n) + \frac{a}{2c}(2n-1)\right]\right\} + C_{n-1}^{m,\pm}\left\{2(n-1)(n+m-1) - \frac{a^2}{2c^2} \pm \frac{ia}{c}(2n+m-2)\right\}, \tag{16}$$

$$T_m^{n,\pm} = C_n^{m,\pm}\left\{2n(n+m) - \frac{a^2}{2c^2} \pm \frac{ia}{c}(2n+m)\right\}. \tag{17}$$

Если рассматривать частичные суммы /12/ рядов /8/ как известные функции, то нетрудно понять, что равенства /13/ для $\kappa=0$ являются системой из двух нелинейных интегральных уравнений для функций $O_m^{n,\pm}(\xi)$. Используя матрицы вида

$$A(\xi) = \begin{pmatrix} A^+(\xi) \\ A^-(\xi) \end{pmatrix}, \quad (A,B)(\xi,t) = \begin{pmatrix} A^+(\xi) & B^-(\xi) \\ A^+(t) & B^-(t) \end{pmatrix}, \tag{18}$$

мы можем записать эту систему следующим образом:

$$O_m^n(\xi) = \Delta O_m^n(\xi) + \frac{i}{2c} \int_\xi^\infty \left(\frac{t-1}{t+1}\right)^{m/2} \{ \det(O_m^n, \sigma_m^n) + \tag{19}$$

$$+ \det(\sigma_m^n, O_m^n) + \det(O_m^n, O_m^n) \} \frac{\Gamma_m^n(t)\,dt}{(t+1)^n},$$

$$\Delta O_m^n(\xi) = \frac{i}{2c} \int_\xi^\infty \left(\frac{t-1}{t+1}\right)^{m/2} \det(\sigma_m^n, \sigma_m^n) \frac{\Gamma_m^n(t)\,dt}{(t+1)^n}. \tag{20}$$

Возьмем произвольное число $x>1$ и рассмотрим линейное пространство Ω_x всех матриц вида $A(\xi)$ /18/, элементы которых являются ограниченными функциями ξ в интервале $\xi \geq x$. При вещественных значениях параметра c ($|c|>0$) матрицы вида $A(\xi)$ с элементами, равными сужениям на интервале $[x,\infty)$ функций /11/, /12/, /15/ и $\Pi_m^\pm(\xi)$, очевидно, принадлежат пространству Ω_x для каждого $x>1$. Нетрудно понять, что пространство является полным относительно нормы

$$\|A\|_x \overset{\Delta}{=} \max\{ \sup_{\xi\geq x} |A^+(\xi)|, \sup_{\xi\geq x} |A^-(\xi)| \}. \tag{21}$$

Покажем, что при некоторых условиях решение уравнения /19/ можно представить сходящимся относительно нормы /21/ итерационным рядом и, таким образом, с помощью n-х частичных сумм асимптотических рядов /8/ можно вычислять значения функций $\Pi_m^\pm(\xi)$ и их первых производных в данной точке с произвольно малой погрешностью. Упомянутые условия даны в следующей теореме.

Теорема. Пусть ξ_a, λ, c ($|c|>0$) - произвольные вещественные числа; n - произвольное натуральное число; и пусть $\{O_{m\nu}^n(\xi)\}_{\nu=0}^\infty$ и $\{\Delta O_{m,\nu}^n(\xi)\}_{\nu=0}^\infty$ - последовательности матриц вида $A(\xi)$ /18/, члены которых определяются из следующих соотношений:

$$O^n_{m,0}(\xi) = \Lambda O^n_m(\xi),$$

$$O^n_{m,\nu}(\xi) = O^n_{m,0}(\xi) + \frac{1}{2c}\int_\xi^\infty \left(\frac{t-1}{t+1}\right)^{m/2} \{\det(O^n_{m,\nu-1}, \sigma^n_m) +$$

$$+ \det(\sigma^n_m, O^n_{m,\nu-1}) + \det(O^n_{m,\nu-1}, O^n_{m,\nu-1})\} \frac{\Gamma^n_m(t)\,dt}{(t+1)^n} \qquad /22/$$

$(\nu = 1,2,\ldots)$,

$$\Delta O^n_{m,\nu}(\xi) = O^n_{m,\nu}(\xi) - O^n_{m,\nu-1}(\xi) \qquad /23/$$

$(\nu = 0,1,\ldots,\ O^n_{m,-1}(\xi) = 0)$.

Тогда можно найти такое число $\xi^n_m(a,\lambda,c) > 1$, что для каждого $x > \xi^n_m$ ряд

$$O^n_m(\xi) = \sum_{\nu=0}^\infty \Lambda O^n_{m,\nu}(\xi) \qquad /24/$$

сходится по норме $\|\cdot\|_x$ и является решением интегрального уравнения /19/. Кроме того, ряд, получаемый почленным дифференцированием ряда /24/, также сходится по норме $\|\cdot\|_x$ и определяет первую производную решения этого уравнения.

Доказательство. Поскольку функции /12/ и /15/ являются ограниченными функциями в интервале $\xi \geq 1$, то можно найти такие числа $\xi^n_{m1} > 1$ и $M^m_n(a,\lambda,c) > 0$, что для $x > \xi_{m1}$ и $\nu = 0,1,\ldots$

$$\left\|\frac{\partial^\kappa O^n_{m,\nu}}{\partial\xi^\kappa}\right\|_x \leq \frac{1}{(1+x)^{n-2/3}} \quad (\kappa = 0,1), \qquad /25/$$

$$\left\|\frac{\partial^\kappa \Lambda O^n_{m,\nu}}{\partial\xi^\kappa}\right\|_x \leq \frac{1}{(1+x)^n}\left\{\frac{M^m_n}{(1+x)^{n-2/3}}\right\}^\nu. \qquad /26/$$

Утверждения теоремы следуют из неравенств /26/, если положить

$$\xi^n_m = \max\{\xi^n_{m1},\ (M^m_n)^{1/(n-2/3)} - 1\}. \qquad /27/$$

Сходимость итерационного ряда /24/ по норме /21/ означает, что он сходится абсолютно и равномерно в бесконечном интервале $\xi \geq x$. Поэтому если известна некоторая частичная сумма $\sigma_m^{n,\pm}(\xi)$ рядов /8/, то значения функций $\Pi_m^{\pm}(\xi)$ и их первых производных для достаточно больших x можно /в принципе/ вычислять по формуле

$$\frac{\partial^\kappa \Pi_m^{\pm}(x)}{\partial x^\kappa} = \frac{\partial^\kappa \sigma_m^{n,\pm}(x)}{\partial x^\kappa} + \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\partial^\kappa}{\partial x^\kappa}[\Delta O_{m,\nu}^{n,\pm}(x)] \quad (\kappa=0,1). \qquad /28/$$

Обычно используется выражение, содержащее не более одного члена ряда /24/:

$$\frac{\partial^\kappa \tilde{\Pi}_m(x)}{\partial x^\kappa} = \frac{\partial^\kappa \sigma_m^{n,\pm}(x)}{\partial x^\kappa} + \frac{\partial^\kappa \Delta O_m^{n,\pm}(x)}{\partial x^\kappa} \quad (\kappa = 0,1). \qquad /29/$$

В этих выражениях участвуют интегралы, которые сводятся к неполной бета-функции и к обобщенным интегралам Френеля /6/.

Если найдены значения регулярных и нерегулярных решений уравнения /3/ и значения их первых производных в подходящей точке x, то фазы $\Delta_{m\ell}(c)$ и нормировочные множители $K_{m\ell}(c)$, входящие в асимптотическую формулу

$$\Pi_{m\ell}(\xi) = \frac{K_{m\ell}(c)}{c\xi} \left[\sin\left(c\xi - \frac{a}{2c}\ln 2c\xi + \Delta_{m\ell} - \frac{\pi\ell}{2}\right) + O(1) \right], \qquad /30/$$

$$(\xi \to \infty,\ c > 0),$$

вычисляются по формулам

$$K_{m\ell}(c) = (x^2 - 1)\,|W(\Pi_{m\ell}, \Pi_{m\ell}^{\pm})|, \qquad /31/$$

$$\Delta_{m\ell}(c) = \frac{a}{2c}\ln 2c + \frac{\pi\ell}{2} + \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{Im} W(\Pi_{m\ell}, \Pi_{m\ell}^{-})}{\operatorname{Re} W(\Pi_{m\ell}, \Pi_{m\ell}^{-})}, \qquad /32/$$

где все определители Вронского $W(f,g)$ определены для $\xi = x$.

3. ОЦЕНКИ ОШИБОК

Чтобы оценить ошибку

$$\Delta\left(\frac{\partial^\kappa \Pi_m^{\pm}(\xi)}{\partial \xi^\kappa}\right) \triangleq \frac{\partial^\kappa \Pi_m^{\pm}(\xi)}{\partial \xi^\kappa} - \frac{\partial^\kappa \tilde{\Pi}_m^{\pm}(\xi)}{\partial \xi^\kappa} \quad (\kappa = 0,1), \qquad /33/$$

которая получается при использовании приближенного выражения /29/, необходимо оценить функции /13/. В этих оценках участвует функция

$$\Lambda_m(t) \equiv \Lambda_m(\alpha,\lambda,c;t) \overset{\Delta}{=} c^2(t^2-1)-\alpha t-\lambda - \frac{m^2-1}{t^2-1}, \quad (m=0,1,\ldots,\ t>1), \qquad /34/$$

для которой легко доказать следующие утверждения:

а/ при произвольных вещественных α , λ , c ($|c|>0$) и $a>1$ можно найти такое число $\xi^m=\xi^m(\alpha,\lambda,c,a)>1$, что для

$$\frac{1}{a} \le \frac{\Lambda_m(t)}{c^2(t^2-1)} \le a \quad (m=0,1,\ldots); \qquad /35/$$

б/ при произвольных вещественных α , λ , c ($|c|>0, |\alpha|>0$) можно найти такое число $\xi_1^m=\xi_1^m(\alpha,\lambda,c)>1$, что для $t\ge\xi_1^m$

$$\Lambda_m^{(0)}(t) \overset{\Delta}{=} \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\Lambda_m(t)}{t^2-1}\right]\operatorname{sign}\alpha \ge 0. \qquad /36/$$

Пусть $[\Lambda_m^{(0)}]$ - множество нулей функции /36/, принадлежащих интервалу $[\xi^m,\infty)$. Множество $[\Lambda_m^{(0)}]$ содержит не более двух чисел. Пусть ξ и t - произвольные числа, удовлетворяющие неравенствам $\xi^m\le\xi\le t$. Рассмотрим следующие случаи:

A_0/ $[\Lambda_m^{(0)}]=\emptyset$ либо $[\Lambda_m^{(0)}]\neq\emptyset$, а для $\tau\in[\xi,t]$ $\Lambda_m^{(0)}(\tau)\ge0$;

A_-/ для $\tau\in[\xi,t]$, $\Lambda_m^{(0)}(\tau)\le0$;

A_2/ в интервале $[\xi,t]$ функция $\Lambda_m^{(0)}(\tau)$ меняет свой знак один и только один раз;

A_3/ в интервале $[\xi,t]$ функция $\Lambda_m^{(0)}(\tau)$ меняет свой знак два раза.

Определим функции

$$F_{m1}^{\pm}(\xi,t) \equiv F_{m1}^{\pm}(\alpha,\lambda,c,a;\xi,t) =$$

$$= \begin{cases} \theta(\mp1)+a^{2\operatorname{sign}\alpha}\theta(\pm1) & \text{в случае } A_0, \\ a^{\pm2\operatorname{sign}\alpha} & \text{в случае } A_2, \\ \theta(\pm)+a^{-2\operatorname{sign}\alpha}\theta(\mp1) & \text{в случае } A_-, \\ a^{\pm2\operatorname{sign}\alpha}[\theta(\mp1)+a^{2\operatorname{sign}\alpha}\theta(\pm1)] & \text{в случае } A_3, \end{cases} \qquad /37/$$

где $\theta(x)$ - функция Хевисайда. Используя функции /37/, докажем лемму.

Лемма. Пусть $a_1(\xi)$ и $a_2(\xi)$ - произвольные вещественные и ограниченные в интервале $(1+\epsilon,\infty)$ функции для некоторого $\epsilon>0$, $\mu,\nu=0,1,\ldots$, и пусть α, λ, c, $a>1$ $(|\alpha|>0, \ |c|>0)$ - произвольные вещественные числа. Тогда, если $t\geq\xi\geq\xi^m$, то имеют место неравенства

$$F^-_{m1}(\xi,t)\,\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\xi,\xi)\leq\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\xi,t)\leq\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\xi,\xi)\,F^+_{m1}(\xi,t), \qquad /38/$$

где

$$\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\xi,t)\equiv\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\alpha,\lambda,c;\xi,t)=\Big\{\frac{\Lambda_m(t)}{t^2-1}\Big[a_1(\xi)\frac{\partial^\mu g_m}{\partial\xi^\mu}(c;\xi,t)+$$

$$+a_2(\xi)\frac{\partial^\nu g_m}{\partial\xi^\nu}(c;\xi,t)\Big]^2+\Big[a_1(\xi)\frac{\partial^{\mu+1}g_m}{\partial t\,\partial\xi^\mu}(c;\xi,t)+ \qquad /39/$$

$$+a_2(\xi)\frac{\partial^{\nu+1}g_m}{\partial t\,\partial\xi^\nu}(c;\xi,t)\Big]^2\Big\}\,\mathrm{sign}\,\alpha.$$

Доказательство неравенств /38/ легко осуществить, имея в виду, что знак производной по t функции /39/ совпадает со знаком функции /36/, а знак производной функции $(t^2-1)\mathcal{T}^m_{\mu\nu}(\xi,t)/\Lambda_m(t)$ противоположен знаку функции /36/.

С помощью леммы нетрудно получить оценки:

$$|\Pi^\pm_m(\xi)|\geq(\xi^2-1)^{-1/2}\sqrt{F^{-\mathrm{sign}\,\alpha}_{m1}(\xi,\infty)} \qquad (\xi\geq\xi^m), \qquad /40/$$

$$\Big|\frac{\partial}{\partial\xi}\Pi^\pm_m(\xi)\Big|\geq\Big\{\Big[\frac{\Lambda_m(\xi)}{(\xi^2-1)^2}+\frac{\xi^2}{(\xi^2-1)^3}\Big]F^{-\mathrm{sign}\,\alpha}_{m1}(\xi,\infty)\Big\}^{1/2},\ (\xi\geq\xi_m). \qquad /41/$$

$$\frac{|O^{n,\pm}_m(\xi)|}{|\Pi^\pm_m(\xi)|}\leq n(n-1)2^{-n}p^n_{m1}(\xi)\,\Big|2B_u(n-1,\frac{m+1}{2})- \qquad /42/$$

$$-(\xi+1)B_u(n,\frac{m+1}{2})\Big|\Big(\frac{\xi-1}{\xi+1}\Big)^{\delta_{m0}/2}\leq\frac{p^n_{m1}(\xi)}{(\xi+1)^{n-1}}$$

$$\Big(\xi^m\leq\xi\leq t,\quad n=2,3,\ldots,\quad u=\frac{2}{\xi+1}\Big),$$

$$p^n_{m1}(\xi) = \left\{ \frac{F^{\operatorname{sign}\alpha}_{m1}(\xi,\infty)(\xi+1)^{\delta_{m0}}}{F^{-\operatorname{sign}\alpha}_{m1}(\xi,\infty)(\xi-1)^{\delta_{m0}}} \right\}^{1/2} \frac{\|\Gamma^n_m\|_\xi}{n(n-1)}, \qquad /43/$$

$$\frac{|\partial O^{n,\pm}_m(\xi)/\partial\xi|}{|\partial \Pi^{\pm}_m(\xi)/\partial\xi|} < 2^{-n} n p^n_{m2}(\xi) \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{\delta_{m0}/2} \times \qquad /44/$$

$$\times B_u\left(n, \frac{m+1}{2}\right) < \frac{p^n_{m2}(\xi)}{(\xi+1)^n}, \quad (\xi^m \le \xi \le t, \quad n = 2,3,\dots),$$

$$p^n_{m2}(\xi) = \frac{\|\Gamma^n_m(\xi)\|_\xi}{nc} \left(\frac{\xi+1}{\xi-1}\right)^{\delta_{m0}/2} \times \qquad /45/$$

$$\times \left\{ \frac{F^{\operatorname{sign}\alpha}_{m1}(\xi,\infty)}{F^{-\operatorname{sign}\alpha}_{m1}(\xi,\infty)} \right\}^{1/2} \sup_{t\ge\xi} \sqrt{\frac{c^2(t^2-1)}{\Lambda_m(t)}},$$

где $B_u(a,b)$ - неполная бета-функция.

Если необходимо вычислить значения нерегулярных решений с относительной ошибкой порядка Δ^2, то вычисления проводятся в точках $\xi \in [x,\infty)$, где

$$x = \max(\xi^m, \xi^m_0), \qquad /46/$$

а ξ^m_0 является максимальным корнем уравнения

$$p^n_{m1}(\xi) = \Delta(\xi+1)^{n-1}. \qquad /47/$$

Для относительной ошибки, которая получается при использовании приближенного выражения /29/, имеет место оценка

$$\frac{|\Delta \Pi^{n,\pm}_m(x)|}{|\Pi^{\pm}_m(x)|} \le \frac{(n-1)\Delta^2}{c(x+1)} \sqrt{F^{-\operatorname{sign}\alpha}_{m1}(x,\infty)} \times \qquad /48/$$

$$\times \left\{ 1 + \frac{n(1+\Delta)}{a(2n-1)} \right\} \quad (c>0).$$

Нетрудно видеть, что если номер частичной суммы $n \sim 10$, то относительная ошибка /48/ имеет порядок Δ^2.

Авторам приятно выразить свою глубокую признательность Л.И.Пономареву за полезные советы и плодотворные обсуждения при подготовке этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ponomarev L.I., Somov L.N. Journ.Comp.Phys., 1976, 20, No.2, p.183.
2. Abramov D.I. et al. J.Phys.B: Atom.Molec.Phys., 1979, vol.12, No.11, p.1761.
3. Nakamura H., Takagi H. Nagoya, IPPJ-AM-16, 1980.
4. Иванов К.И., Иванова М.П. ОИЯИ, Р4-12575, Дубна, 1979.
5. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
6. Справочник по специальным функциям /под ред. В.А.Диткина и Л.Н.Кармазиной/. "Наука", М., 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 июля 1981 года.